



TITLE:

# Phase Transitions in KDP and DKDP and in Two-Doublet Spin System

AUTHOR(S):

中野, 藤生

---

CITATION:

中野, 藤生. Phase Transitions in KDP and DKDP and in Two-Doublet Spin System. 物性研究 1977, 29(1): A32-A35

ISSUE DATE:

1977-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89413>

RIGHT:

中野藤生

と比べて、オーダーとしては弱い普遍性と矛盾しない ( $\Delta_\lambda^{(n,1)}/\nu \simeq \Delta_0^{(n,1)} = \text{普遍}$ )。より定量的な結果は、収束のよい線形緩和関数<sup>3)</sup>を評価すると得られるであろう。

結論としては、動的現象でも弱い普遍性が成立しているようである。これからの方向に関して次の点を示す。(i)繰り込み群によるアプローチ。一つの方法として連続体模型を作ることがある。Eight Vertex 系では普通のG-L系と違って、2つの場が必要になってくる。(ii)摂動論<sup>5)</sup> 臨界点で  $M(t) \sim t^{-\omega}$  ( $\omega = \beta/\Delta^{(1)}$ ) なので、 $\omega$  が  $\lambda$  に依れば  $\frac{\partial}{\partial \lambda} M(t) \sim -\frac{\partial \omega}{\partial \lambda} \ln t + \dots$  という形がでる。この場合  $\ln t$  の項が出ない事を示せば、 $\frac{\partial \omega}{\partial \lambda} = 0$  より  $\beta/\Delta^{(1)} = \omega_0$ ,  $\Delta^{(1)} = \beta/\omega_0 = \frac{\beta_0}{\omega_0} (1 - \frac{\pi}{4}\lambda) = \Delta_0 (1 - \frac{\pi}{4}\lambda)$  となって1次の範囲で弱い普遍性が有効であることがわかる。しかし、非平衡での平均を問題にしなければならぬので、証明は難しい。

## 参 考 文 献

- 1) R. J. Baxter, Phys. Rev. Letters **26** (1971), 832.
- 2) M. Suzuki, 物性研究 (前回の報告)
- 3) H. Yahata and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Japan **27** (1969), 1421.
- 4) Z. Csépes and Z. Rácz, preprint (Eötvös Univ., Budapest)
- 5) L. P. Kadanoff and F. J. Wegner, Phys. Rev. **B4** (1971), 3989.

## Phase Transitions in KDP and DKDP and in Two-Douplet Spin System

名大・工 中 野 藤 生

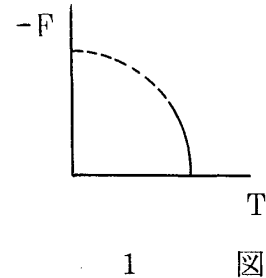
### § 1 序 論

本節は前おきである。スピン変数  $\sigma_i$  ( $\pm 1, 0$  の3つの値をとる) によって表される  $i$  番格子点の各状態が  $D(\sigma_i)$  重に縮退しているとする。格子全体のハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j \quad (1)$$

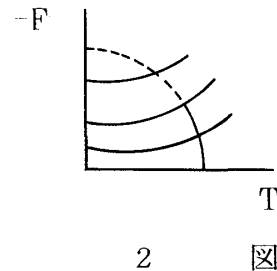
によって表される。論を的確にするため最近接点对  $(i, j)$  の間の相互作用のみに限定した。 $D(1) = D(-1)$  とすると、全体系に起る相転移はパラメータ  $Z \equiv D(0)/D(1)$  に依存する。 $Z$  は格子点の相対的状态和と考えてもよい。 $Z > Z_c$  (分子場近似で求めると  $Z_c = 4$ ) ならば 1 次転移が  $Z \leq Z_c$  では 2 次転移が起る。したがって  $Z = Z_c$  は 3 重臨界点に相当する。 $Z = e^{-\beta F}$  とおくと、1 図

のような相図が描かれる。曲線内 (原点側) は秩序相、曲線外は無秩序相に当る。また点線は 1 次転移、実線は 2 次転移を表す。格子点上の成分系の正体が分ると、 $F = F(T)$  が温度の関数として定まるので、これを相図上に重ね描く。



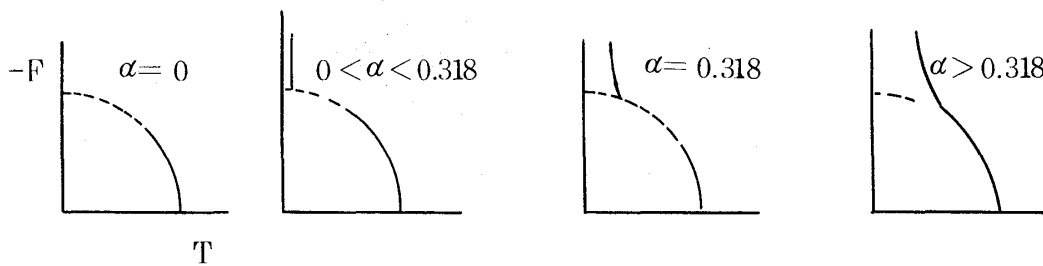
これが先の転移曲線と交る点が転移点で、交点が破線 (実線) 上にあれば 1(2) 次転移である。

1 重項・3 重項スピン系 (3 重項が 4 だけ高い) の場合には、 $F = -hT \ln(C \frac{4}{kT} + 1)$  となる (2 図)。



## § 2 Two-Doublet System

ハミルトニアン(1)について  $\sigma_i = \pm 1, \pm \alpha$  とする (Two-doublet system の特殊な場合<sup>2)</sup>。これで相転移の多様性は尽される)。縮退度を  $D(\sigma_i) = D(-\sigma_i)$  とし、比  $Z \equiv D(\alpha)/D(1)$  を用いて相転移が分類され、3 図が得られる。これは  $UI_3$  の 1 次転移を説明す



3 図

るのに用いられた。§ 1 の模型で  $Z < 2$  の場合には Lee-Yang の円周定理が成立つ。本節の模型では  $\alpha = 1/3$  の場合 (スピン 3/2 に該当) には  $Z \leq 3$  で成立つ。2 次転移

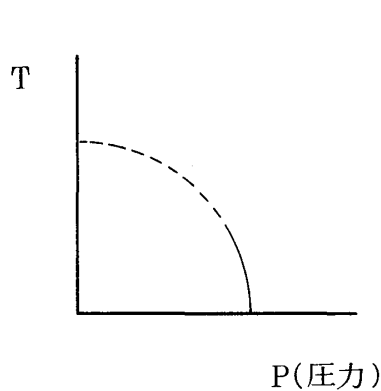
で円周定理の成立しない領域はあるのかどうか？

### § 3 KDPまたはDKDP

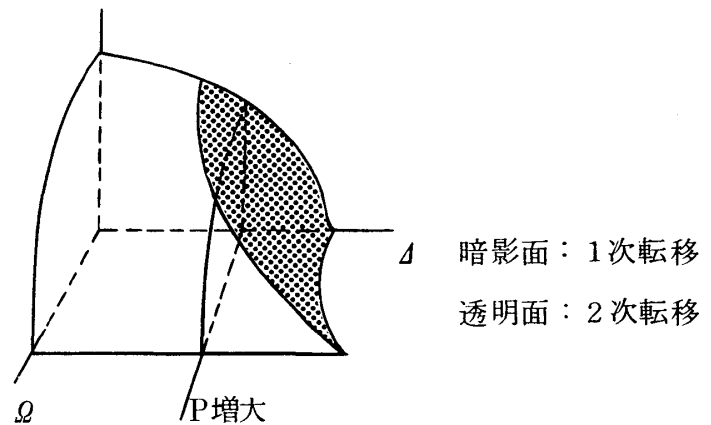
徳永・松原の論じたKDPすなわち $\text{KH}_2\text{PO}_4$ の模型がある<sup>3)</sup>。 $\text{PO}_4$ 対のO-O対が1個の陽子によって水素結合になっている。その陽子に対するポテンシャルは double-well 型である。このポテンシャルの下における基底状態の他に一つの励起状態を取入れた two-doublet 模型を考える<sup>4)</sup>。励起 doublet については transfer  $\mathcal{Q}$  も考慮に入れる。全陽子系のハミルトニアンとして

$$H = -\frac{\Delta}{2} \sum_i c_i - \mathcal{Q} \sum_i \frac{1-c_i}{2} \sigma_{2i}^x - J \sum_{i < j} \frac{1+c_i}{2} \sigma_{1i}^z \frac{1+c_j}{2} \sigma_{1j}^z \\ - K \sum_{i,j} \frac{1+c_i}{2} \sigma_{1i}^z \frac{1-c_j}{2} \sigma_{2j}^z - L \sum_{i < j} \frac{1+c_i}{2} \sigma_{1i} \frac{1+c_j}{2} \sigma_{1j} \quad (1)$$

を採る。 $\Delta$ は励起のエネルギー、 $c_i = -1, 1$  は陽子の励起非励起を、 $\sigma_{1i}^z, \sigma_{2j}^z$  は  $i$  ボンドの陽子がどちらの谷にあるかを表す。実験<sup>5)</sup>では4図のようになり、1次転移温度が高い(1図と逆)。(1)の解析によれば、適当なパラメータの下で5図が得られ、4図が理解されること、また同位元素効果(陽子-重陽子)もよく理解されることが分った。



4 図



5 図

### 参 考 文 献

- 1) M. Yamashita and H. Nakano, Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 1042.

- 2) M. Yamashita and H. Nakano, *ibid.* 57 (1977) 759.
- 3) M. Tokunaga and T. Matsubara, *ibid.* 36 (1966) 857.
- 4) K. Ohtomi and H. Nakano, 投稿(J. Phys. Soc. Japan)
- 5) G. A. Samara, Phys. Rev. Lett. 27 (1971) 103,  
V. H. Schmidt et al., *ibid.* 37 (1976) 839.

## Non-Newtonian Effect Near the Critical Point

九大・理 小 貫 明

臨界点近くの流体のダイナミックスは大きなゆらぎのため通常の流体力学では記述できない今までの研究は平衡のまわりのゆらぎを扱っており、平衡から大きくはずれたときのダイナミックスの研究はほとんどなされていない。(スピノダル分解については川崎が手がけている。)ここでは Shear Flow が存在するときのゆらぎの分布とダイナミックスを考える。高分子溶液と共通した問題がある。どちらも大きな液滴もしくは分子の存在が通常の流体力学からのずれを引き起こすのである。

マクロな流れは  $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = Dy \mathbf{e}_x$  で与えられとする。オーダーパラメーター  $s(\mathbf{r}, t)$  は速度場  $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$  で convective に運ばれる。

$$\frac{\partial}{\partial t} s(\mathbf{r}, t) + \nabla(\mathbf{s} \mathbf{v}) = 0 \quad (1)$$

ただし、 $\mathbf{v}$  の平均は今の場合 0 ではなく、

$$\langle \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \rangle = Dy \mathbf{e}_x \quad (2)$$

一方、

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{k_B T}{\rho_0} s \nabla \frac{\delta \Phi_0}{\delta s} + \frac{\eta^*}{\rho} \Delta \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \left( \zeta^* + \frac{\eta^*}{3} \right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{F}_R \quad (3)$$

ここに  $\Phi_0$  は熱力学的 potential。

計算の途中は省き結果だけのべる。

流れによってできる波数として、
$$k_c = \left( \frac{\eta^*}{k_B T} D \right)^{\frac{1}{3}} \quad (4)$$